

$\text{Al}_{86-x}\text{Fe}_{14+x}$ 准晶相合金的 Mössbauer 谱

凌启芬 陈冠冕 赵见高 詹文山

(中国科学院物理研究所)

1988年7月12日收到

本文研究了 $\text{Al}_{86-x}\text{Fe}_{14+x}$ ($x = 0, 2, 4, 6, 8.5$) 准晶相合金的 Mössbauer 谱, 结果表明对 $x = 0$ 的 $\text{Al}_{86}\text{Fe}_{14}$ 合金中以 decagonal 准晶相为主, 谱拟合结果为两套面积积分为 1.69, 近于黄金分割的亚谱组成, 支持了准晶相为两种 “penrose” 多面体组成的观点. 当 x 增加时, 出现的晶态含量增加; $x = 8.5$ 时, 几乎全部为晶态 Al_3Fe 相.

自从 1984 年首次报道在急冷 Al-Mn 合金中发现 “20 面体准晶相”^[1] 以来, 引起凝聚态物理学界和化学界的极大兴趣. 在 Al-Fe 合金中也观察到与 20 面体相关的 10 次对称 decagonal 准晶 D 相^[2], 属点群 $10/\text{mmm}$, 且在一个方向上有平移对称性. 目前对准晶体合金的 Mössbauer 效应研究还不很多^[3-8], 加之准晶相的原子结构仍不很清楚, 故对 Mössbauer 谱的拟合就较困难. 目前对 20 面体 I 相 (icosahedral) 的拟合方法有两种: 一是认为准晶体是由两类 “penrose” 多面体组成的, 尽管作无规分布, 但其组成比例系按黄金分割, 因此拟合时就用黄金分割作强度的约束条件; 另一办法是用一套、两套或三套两峰四极谱或按连续谱来作拟合. 这些结果常常表明在准晶相结构中, 铁原子晶位可能存在两种以上. 本文用 Mössbauer 谱仪研究了 $\text{Al}_{86-x}\text{Fe}_{14+x}$ ($x = 0, 2, 4, 6, 8.5$) 系列合金的相组成规律. 对 $x = 0, 2, 4, 6$ 四种样品均用两套双线准晶亚谱和三套晶体相谱, 共 5 套谱作计算机拟合.

所用样品是在 Ar 气氛中由熔态急冷法制备的, 厚约 $20\mu\text{m}$, 宽约 2mm 的薄带. 单辊的线速度约为 40m/s. 对 $x = 0$ 的样品 $\text{Al}_{86}\text{Fe}_{14}$ 中, 除含有较多的准晶 D(decagonal) 相

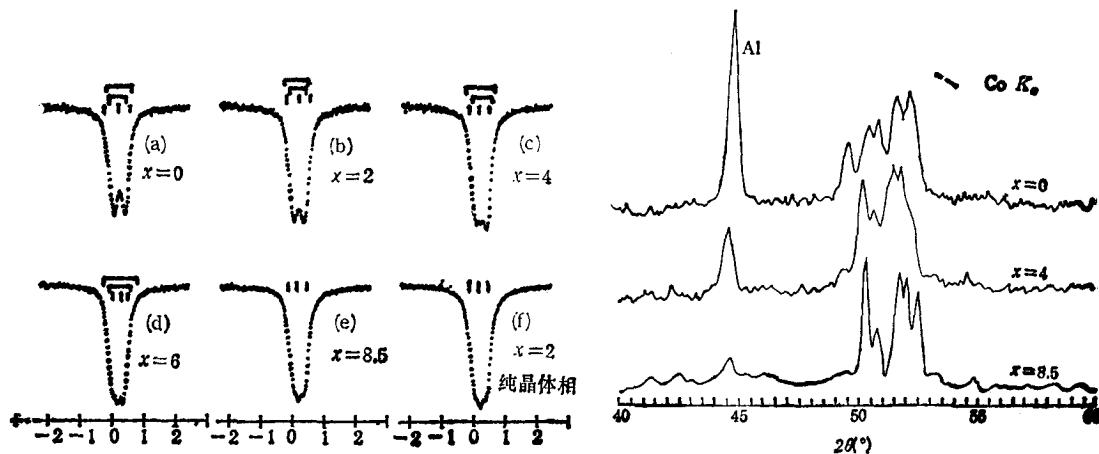


图1 $\text{Al}_{86-x}\text{Fe}_{14+x}$ 合金的室温 Mössbauer 谱

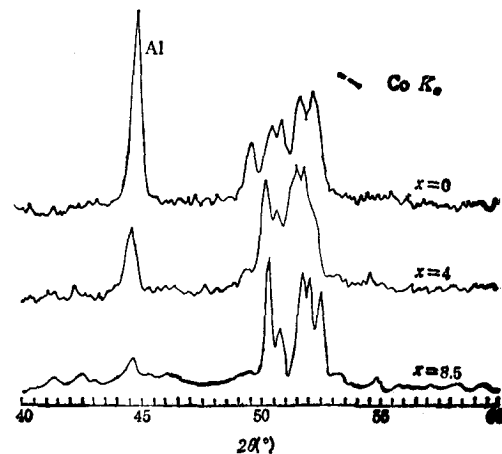


图2 $\text{Al}_{86-x}\text{Fe}_{14+x}$ 合金的室温 X 射线衍射谱

外,还有一定的铝析出。我们试图增加铁含量以降低铝析出从而获得单相的准晶体.分别测量了 $\text{Al}_{35-x}\text{Fe}_{14+x}$ 系列的室温谱(见图 1)和 $x=0$ 时的温度谱,温度范围为 300—800K;同时还测量了各样品成分相应的晶态谱.图 1 中 f 即为 $x=2$ 时的晶态谱,其它组分的谱形类同,不一一绘出.由图 1 可见,随 x 的增加,即铁含量的增加,谱形从 $x=0$ 的两线谱逐步在中间出现尖峰谱,直至 $x=8.5$ 时几乎仅表现为单线谱.而这种单线谱与单斜晶态相 Al_3Fe 的谱线非常相同,结合 X 射线衍射的结果可以认为,随着铁含量的增加,从 $x=0$ 的准晶 D 相逐步转变为 Al_3Fe 晶态相.图 2 即为相应几种组分的 X 射线衍射谱.图 2 中横坐标 $2\theta \approx 50-53^\circ$ 之间的衍射谱表示了相应的准晶相和晶态相的衍射花样,但未作指标化,不能具体标明谱线.

$x=0$ 所对应的 $\text{Al}_{35}\text{Fe}_{14}$ 合金的温度谱表明,当温度升高至 300°C 时就开始晶化析出 Al_3Fe 相.

在 Levine 等人^[9]提出的准晶相模型中,认为准晶体结构是由两类“penrose”多面体组成的.但在这种结构中原子位置并未确定.根据 Levine 模型和我们的实验观察和分析,对准晶相的 Mössbauer 谱解谱时拟采用两组亚谱拟合;而对于单斜结构的 Al_3Fe 晶态相,有 5 类铁原子晶位,一般解其 Mössbauer 谱时,需应用 5 组亚谱,但因用 5 组独立的 Mössbauer 参数拟合谱时,很难分离出来,因而采用 3 组亚谱更合适.这样,对 $x=0, 2, 4, 6$ 的 $\text{Al}_{35-x}\text{Fe}_{14+x}$ 合金的 Mössbauer 谱采用两组准晶相亚谱和 3 组晶态相亚谱共 5 组混合谱进行计算机拟合.表 1 给出各样品中两组准晶相亚谱的拟合参数及准晶相谱线面积与晶态相谱线面积积分比例,即各样品中准晶相成分与晶态相成分的比例.对 $x=8.5$ 的样品则认为仅为单斜结构的 Al_3Fe 相,只用 3 组单线谱拟合,所得的 3 个单线线宽分别为 0.26, 0.28 和 0.30mm/s.

拟合结果表明, $x=4$ 的 $\text{Al}_{31}\text{Fe}_{18}$ 合金,其谱型中间出现尖峰时,合金已几乎含有一半的晶态相.同时根据 $\text{Al}_{35-x}\text{Fe}_{14+x}$ 合金的 X 射线衍射谱强度变化分析得到,随铁含量增加,铝的析出确有减少,且也出现了大量的 Al_3Fe 晶态相. $x=8.5$ 时几乎已全部成为

表 1 $\text{Al}_{35-x}\text{Fe}_{14+x}$ 合金准晶相亚谱 Mössbauer 参数

样 品	$\delta_1(\text{mm/s})$	$\Delta E_{Q1}(\text{mm/s})$	$\delta_2(\text{mm/s})$	$\Delta E_{Q2}(\text{mm/s})$	准晶相含量(%)	晶态相含量(%)
$x=0$ $\text{Al}_{35}\text{Fe}_{14}$	0.18	0.44	0.14	0.25	85.7	14.3
$x=2$ $\text{Al}_{33}\text{Fe}_{16}$	0.15	0.54	0.17	0.28	80.4	19.6
$x=4$ $\text{Al}_{31}\text{Fe}_{18}$	0.15	0.60	0.19	0.35	52.2	47.9
$x=6$ $\text{Al}_{29}\text{Fe}_{20}$	0.15	0.64	0.16	0.45	26.9	73.2
$x=8.5$ $\text{Al}_{26.5}\text{Fe}_{22.5}$						100

注: δ 为同质异能移位; ΔE_Q 为电四极劈裂.

Al_3Fe 晶体. 因此,通过增加铁含量而想获得单相 Al-Fe 准晶体是行不通的.也许这种准

晶 D 相 (decagonal) 正是靠与某些晶相的共存而得以稳定存在。

对 $x = 0$ 的温度谱作计算机拟合表明, 当 300°C 时, 样品已有近一半晶化为稳定单斜 Al_2Fe 相, 这时准晶相与晶态相成分的面积比为 49% 和 51%。

综合 Mössbauer 谱及 X 衍射谱分析得到, $x = 0$ 时样品主要由 Al 和准晶 D 相 (decagonal) 组成, 拟合表明准晶含量约为 86%, 其谱为电四极劈裂双线谱, 双线谱稍有不对称, 比例为 $h_1/h_2 = 1.03$, 也许反映了铁原子不只存在一种晶位。从表 1 可见, 本系列合金中的准晶相部分, 随 x 的增加, 电四极劈裂 ΔE_Q 也增大, 电场梯度增大, 这表明 Mössbauer 共振原子的局域环境不对称性更加严重。计算机拟合给出 $x = 0$ 的两组准晶相亚谱面积比为 1.69, 和黄金分割值很接近。如果说 20 面体准晶相是由两种 “penrose” 多面体构成, 那么这种 10 次对称 D (decagonal) 相准晶体多少也与两种按黄金分割比例而构成的多面体有关。

- [1] D. Shechtman *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **53**(1984), 1951.
- [2] K. K. Fung *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **56**(1986), 2060.
- [3] R. A. Dunlap *et al.*, *Hyperfine Interaction*, **28**(1986), 963.
- [4] L. J. Swartzendruber, *et al.*, *Phys. Rev.*, **B32**(1985), 1383
- [5] M. Zibschuty, *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **56**(1986), 169.
- [6] J. Schurer *et al.*, *Solid State Commun.*, **59**(1986), 619.
- [7] H. Chacham *et al.*, *Phys. Rev.*, **B35**(1987), 1602.
- [8] B. Koopmans *et al.*, *Phys. Rev.*, **B35**(1987), 3005.
- [9] D. Levine *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **53**(1984), 2477.

MÖSSBAUER STUDY ON $\text{Al}_{86-x}\text{Fe}_{14+x}$ QUASICRYSTAL ALLOYS

LING QI-FEN CHEN GUAN-MIAN ZHAO JIAN-GAO ZHAN WEN-SHAN

(Institute of Physics, Academia Sinica)

ABSTRACT

We report here the Mössbauer study on $\text{Al}_{86-x}\text{Fe}_{14+x}$ ($x=0, 2, 4, 6, 8.5$) quasicrystal alloys. The result shows that there is mostly decagonal phase for $x=0$, it can be fitted by two sub-spectra which have area ratio of 1.69, close to the value of the golden mean. It implies that quasicrystal structure includes two kinds of “penrose polyhedrons”. The alloys we studied here contain more crystalline phases when x increasing. The alloy with $x=8.5$ contains almost only crystalline Al_2Fe phase.